



TITLE:

AB_3型二次合金におけるクラスターの時間発展: コンピュータシミュレーションによる研究(基研長期研究計画「非線型・非平衡状態の統計力学」, 研究会報告)

AUTHOR(S):

西村, 克之; 橋本, 巍洲

CITATION:

西村, 克之 ...[et al]. AB_3型二次合金におけるクラスターの時間発展: コンピュータシミュレーションによる研究(基研長期研究計画「非線型・非平衡状態の統計力学」, 研究会報告). 物性研究 1978, 29(6): F9-F11

ISSUE DATE:

1978-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89503>

RIGHT:

参 考 文 献

- 1) T. Hashimoto, T. Miyoshi and H. Ohtsuka: Phys. Rev. 13B (1976) 1119.
- 2) K. Kawasaki, M.C. Yalabik and J.D. Gunton: to be published in Phys. Rev. A.
- 3) C. Kawabata and K. Kawasaki: to be published Phys. Letters A.

A B₃ 型二次合金におけるクラスターの時間発展

— コンピュータシミュレーションによる研究 —

東工大・理 西 村 克 之
橋 本 巍 洲

平衡状態に置かれている系のパラメータを急激に変化させて、不安定あるいは準安定などの平衡から遠く離れた状態にしたとき、この系が新たな平衡状態に移っていくさいの過渡過程がどのような法則に支配されるかということは非常に興味深い。我々は秩序無秩序型の一次転移を示す二元合金 Cu₃ Au について、抵抗の緩和、X線によるクラスターサイズの時間発展などの実験結果を報告してきた¹⁾が、さらに理解を深めるためにここでは全スピンの保存する場合の Ising スピンモデル (Kawasaki's Spin Exchange Model) を用いて計算機シミュレーションを行ない、実験と比較対照を行なった。

用いた格子は Cu₃ Au と同じ f. c. c. である。サイズは単位胞の数にして 15×15×15 (3次元)、原子の総数にして 13,500 個である。ハミルトニアン、遷移確率の表式は Binder²⁾ が相分離の問題に使ったのと同様のものを用いた。

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \mu_i \mu_j - \sum_i H_i \mu_i$$

$$W(i \rightarrow \ell_i) = \frac{1}{2\tau_s} \left\{ 1 - \tanh \frac{1}{2k_B T} \left[\sum_{j \left(\substack{\neq i \\ \neq \ell_i} \right)} J_{ij} \mu_j (\mu_i - \mu_{\ell_i}) - \sum_{j \left(\substack{\neq i \\ \neq \ell_i} \right)} J_{j\ell_i} \mu_j (\mu_i - \mu_{\ell_i}) \right] \right\}$$

二相分離の場合には、Binder²⁾や A. Sur et al.³⁾が行なっているように $J > 0$ であるが、秩序無秩序転移の場合には同種の原子が隣り合うのを嫌うように配列するので $J < 0$ となる。この場合、4種類の antiphase domain ができるので、クラスターという言葉を用いる。同じドメインに属し位相が同じ部分の広がりという意味で用いる。周期的境界条件を用い、まず 1 : 3 の割合でランダムに A, B 原子を f.c.c. 格子に配置させ、その後種々の $J/k_B T$ についてモンテカルロシミュレーションを行なった。

図 1 に一例として、 $J/k_B T = -1.05$ のときにクラスターサイズの分布 $VN(V)$ が時間 (モンテカルロステップ/スピンの) とともにどのように変化するかを示した。このような分布から、X線の実験で得られる量である平均クラスターサイズ $\bar{D} = \frac{\sum V^4 N(V)}{\sum V N(V)}$ の時間変化を求めた。図 2 にこの結果を示す。 \bar{D} の変化は初期の段階でゆるやかに徐々に立上る。これは実験結果¹⁾と定性的に一致しているが、転移点近傍で関数形が変わってくる傾向は実験と異なっている。又、転移点に近づく程、クラスターの成長は遅くなっており、一種の slowing down が起

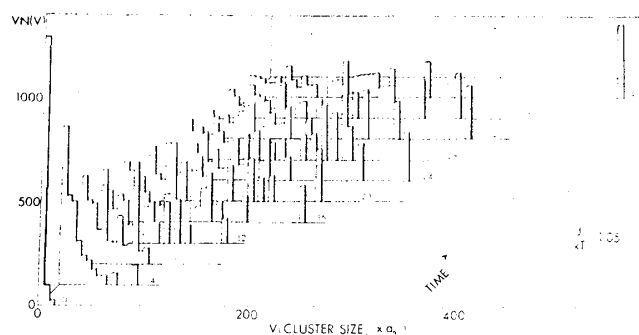


図 1

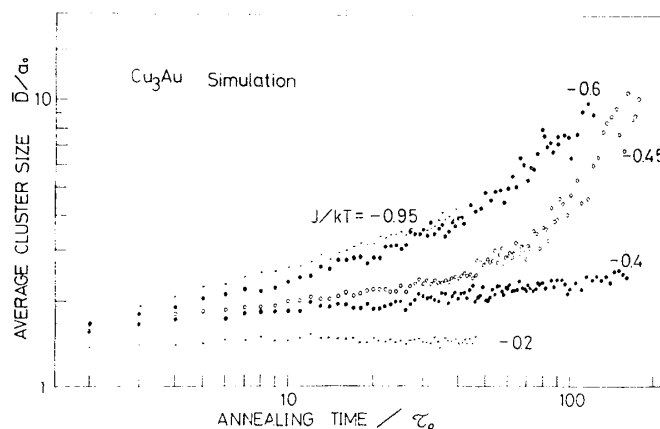


図 2

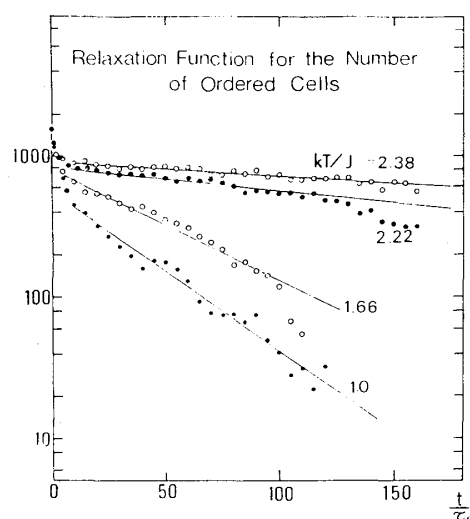


図 3

ていることが分る。4種類のクラスターに属している単位胞の総数 N_{OC} について緩和関数を調べてみると、図3のようになる。かなりよく指数関数にのっており、転移点に近づく程傾きが小さくなっている。これより緩和時間を求めると、図4に示すようになる。これは抵抗の測定から実験的に求めた緩和時間の温度依存性と定性的によく一致している。従って、抵抗の時間変化がオーダー又はディスオーダーの部分の大きさに依存し、クラスターの大きさに依存するものではないということを示唆している。

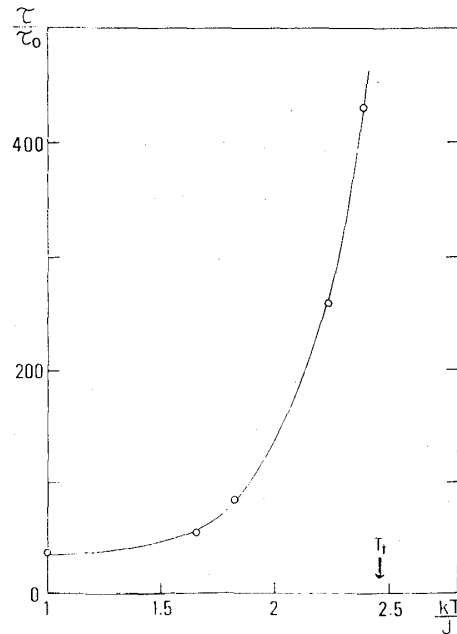


図 4

参 考 文 献

- 1) 西村, 橋本, 竹内, 物理学会第 32 回年会予稿物性 B p10
K. Nishimura, Y. Takeuchi and T. Hashimoto; to be submitted to Solid State Commun.
T. Hashimoto et al.; Phys. Rev. **13** (1976) 1119
- 2) K. Binder Z. Phys: K **267** (1974) 313
- 3) A. Sur et al. Phys. Rev. **15B** (1977) 3014

合金の相分離の時間発展

山口大教育 古 川 浩

急冷された 2 元合金の時間発展を議論する。モデルとして Ginzburg - Landau 型方程式にしたがうものを仮定する。

$$\frac{d}{dt} \eta_{\mathbf{k}} = -k^{\theta} k_B T L \frac{\delta F}{\delta \eta_{\mathbf{k}}^*(t)} + g_{\mathbf{k}}(t), \quad (1)$$